

мы. В качестве подвижной фазы применяли систему растворителей гексан – ацетон – ацетонитрил – трихлоруксусная кислота (3:3:3:0,1).

Хроматографировали в присутствии стандарта. Проявляли пятно анестетика реактивом Драгендорфа, при этом оно окрашивалось в коричневатый цвет, фон пластины имел оранжевый цвет. Хроматограммы сканировали на планшетном сканере. Анестезин идентифицировали по величине коэффициента подвижности ($R_f = 0,94 \pm 0,02$).

Содержание анестезина в мази «Гепарин» рассчитывали с применением компьютерной программы «Sorbfil TLC», по градуировочному графику в координатах: $y = 13656 \cdot x + 318$, где x – количество вещества, y – площадь пятна. Компьютерная обработка хроматограмм способствует снижению затрат времени и труда на получение информации о составе анализируемой пробы, а также улучшает статистические характеристики анализа [1].

Методика не требует наличия дорогостоящего оборудования, легковыполнима, экспрессна. Относительная погрешность определения анестезина не превышает 10 %.

1. Коренман Я.И., Чибисова Т.В., Суханов П.Т. и др. Экстракционно-хроматографическое определение местных анестетиков в водных средах // Аналитика и контроль. 2013. Т. 17, № 4. С. 465–471.

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭКСТРАКЦИОННЫХ СВОЙСТВ ПИЩЕВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

Санникова Н.Ю., Суханов П.Т., Коренман Я.И.

Воронежский государственный университет инженерных технологий
394036, г. Воронеж, пр. Революции, д. 19

Нейронные сети – успешно развивающийся раздел искусственно-го интеллекта. Важное свойство нейронной сети – способность к обучению и обобщению накопленных знаний. Натренированная на ограниченном множестве данных сеть способна обобщать полученную информацию и, кроме того, показывать хорошие результаты на данных, не применявшихся в процессе обучения.

Цель применения ИНС – прогнозирование коэффициентов распределения пищевых красителей в различных экстракционных системах.

Для прогнозирования экстракционных характеристик красителей нами применен однослойный мультиперсептрон. Он состоит из нейро-

нов, расположенных на разных уровнях, причем помимо входного и выходного слоев имеется еще как минимум один внутренний (скрытый) слой искусственной нейронной сети.

Входные параметры для обучения ИНС:

- показатель гидрофильности красителей N ;
- коэффициент подвижности R_f ;
- число ароматических циклов, количество и характер заместителей;
- равновесное соотношение фаз в экстракционной системе;
- коэффициенты распределения красителей в системе гидрофильный растворитель – водно-солевой раствор D.

Обучающую выборку составляли для 3 красителей по 5 параметрам. Входные параметры в обучающей и тестовой выборках нормировали по уравнению:

$$x = \frac{x_i - (\max x_i + \min x_i) / 2}{(\max x_i - \min x_i) / 2},$$

где x – нормированное значение входного параметра; x_i – компонента входного вектора; $\max x_i$ и $\min x_i$ – максимальное и минимальное значения компоненты, вычисленные по всей обучающей выборке.

Показатели, описывающие строение красителей, нормировали по их присутствию или отсутствию (1 и –1 соответственно). Обучение проводили с заданной точностью $\pm 0,002$. Установлено, что наибольший вклад в прогнозирование коэффициентов распределения красителей вносит равновесное соотношение фаз после экстракции. Наименее значимый показатель – коэффициент R_f .

Для проверки соответствия сети поставленной задаче нейронную сеть тестировали на прогнозирование коэффициентов распределения красителя E110 в системе гидрофильный растворитель – водный раствор $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$:

Растворитель	Коэффициент распределения красителя		
	дано	прогноз	относительная погрешность, %
ацетон	1050	1100	4,7
1,4-диоксан	310	323	4,2
изопропиловый спирт	840	810	3,6

Полученная нейронная сеть прогнозирует коэффициенты распределения красителей с относительной погрешностью не более 4–5 %, что намного выше погрешности стандартных фотометрических методик определения (8–10 %).

ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРАСИТЕЛЕЙ С ПРИМЕНЕНИЕМ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ПОДВИЖНОЙ ФАЗЫ

Санникова Н.Ю., Суханов П.Т., Коренман Я.И.

Воронежский государственный университет инженерных технологий
394036, г. Воронеж, пр. Революции, д. 19

Актуальная задача аналитического контроля производства пищевых продуктов и фармацевтических препаратов (таблеток, оболочек капсул) – разработка надежных способов количественного определения синтетических красителей. Применение современных методов (ВЭЖХ, капиллярный электрофорез) связано с использованием сложного и дорогостоящего оборудования, требует специальной подготовки обслуживающего персонала и вряд ли перспективно для выполнения массовых анализов в условиях лабораторий пищевых предприятий. Решение задачи возможно с применением жидкостной экстракции и последующего анализа концентрата.

Цель исследования – разработка эффективных подвижных фаз для определения красителей методом хроматографии в тонком слое.

Объекты исследования – синтетические красители E102, E110, E122, E124, E129, E151. Данные соединения широко применяются для придания соответствующей окраски пищевым продуктам, безалкогольным напиткам и фармацевтическим препаратам. Однако чрезмерное употребление красителей с пищей может приводить к необратимым последствиям в организме человека (аллергия, заболевания печени).

Красители – высокогидрофильные соединения, поэтому подвижная фаза должна содержать воду (как основной компонент) и, при необходимости, гидрофильный растворитель. Нами изучены тройные смеси на основе н.бутилового, изобутилового, изопропилового и этилового спиртов, ацетона и воды. Установлено, что наиболее селективными системами для разделения синтетических красителей являются смеси:

- 1) изобутиловый (н.бутиловый) спирт – ацетон – вода;
- 2) изобутиловый (н.бутиловый) спирт – этиловый спирт – вода.

При замене воды в составе подвижной фазы раствором гидроксида калия с концентрацией 0,1 моль/дм³ получают хроматограммы с бо-